

Vollantrag auf Einrichtung eines LOEWE-Schwerpunktes an der Justus-Liebig-Universität Gießen (Federführung)
„AmbiProbe – Massenspektrometrische *in-situ*-Analytik für die Problembereiche Gesundheit, Umwelt, Klima und Sicherheit“

Projekt C2

Mobile hochauflösende Multireflexions-Flugzeitmassenspektrometrie

Wolfgang R. Pläß, Christoph Scheidenberger

II. Physikalisches Institut, Justus-Liebig-Universität Gießen und GSI Darmstadt

Zusammenfassung

Ziel: Design, Konstruktion, Aufbau, Inbetriebnahme und Charakterisierung eines mobilen und kompakten hochauflösenden Massenspektrometers, das minimale Infrastrukturanforderungen aufweist und Massengenauigkeiten im sub-ppm-Bereich erzielt

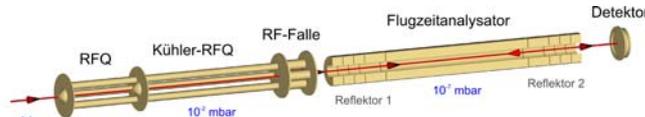
Methoden: Multireflexions-Flugzeitmassenspektrometrie

Innovativer Aspekt: Hochgenaue, hochauflösende Massenspektrometrie mit transportablem Gerät verfügbar, kompakte und leichte Bauweise

Verknüpfung mit anderen Schwerpunkt-Projekten: A1, A3, B1, C3

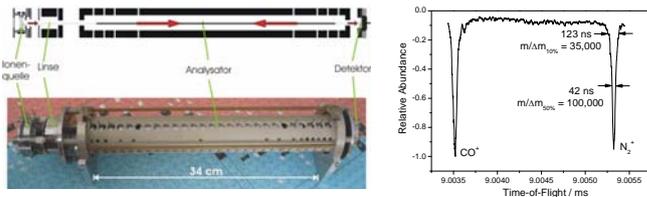
Ziele

- Design, Bau und Inbetriebnahme eines mobilen MR-TOF-MS
- Erprobung und Charakterisierung des MR-TOF-MS mit in-situ-Ionenquellen und Transfersystemen
- Einsatz des MR-TOF-MS zur in-situ Strukturaufklärung und Identifizierung
- Ausbildung von Studenten und Doktoranden, Zusammenarbeit mit Industriepartnern

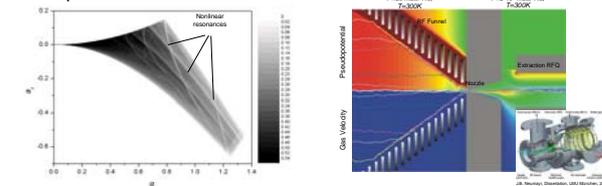


Vorarbeiten

- Entwicklung, Aufbau und Erprobung eines coaxialen Multireflexions-Flugzeitmassenspektrometers, Erzielung eines Massenauflösungsvermögens von 100.000



- Entwicklung von RF-Quadrupolen und Fallen zum Ionentransport, Ionen-speicherung und -Kühlung, Untersuchung und Optimierung von gasgefüllten Stoppzellen für schnelle Ionenstrahlen
- Aufbau von Spannungsstabilisierungen, Hochvoltpulsern, RF-Generatoren und Spulensystemen für Flugzeitmassenspektrometer und RF-Fallen
- Ionentrajektorien-Simulationsprogramm ITSIM; vielfältige Simulationsstudien von Massenspektrometern



Literatur

W.R. Pläß, T. Dickel, U. Czok, H. Geissel, M. Petrick, K. Reinheimer, C. Scheidenberger, M.I. Yavor, Isobar separation by time-of-flight mass spectrometry for low-energy radioactive ion beam facilities, *Nucl. Instrum. Methods B* **266** (2008) 4560.

W.R. Pläß, T. Dickel, B. Fabian, E. Haettner, An Advanced Concept for Mass Spectrometry Simulations - The Ion Trajectory Simulation Program ITSIM 6, Proceedings of the 56th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, Denver, Colorado, USA, 2008.

W.R. Pläß, T. Dickel, M. Petrick, D. Boutin, Z. Di, T. Fleckenstein, H. Geissel, C. Jesch, C. Scheidenberger, Z. Wang, An RF quadrupole-time-of-flight system for isobar separation and multiplexed low-energy Rare-Isotope Beam experiments, *Eur. Phys. J. Special Topics* **150** (2007) 367.

W.R. Plass, H. Li, R.G. Cooks, Theory, simulation and measurement of chemical mass shifts in RF quadrupole ion traps, *Int. J. Mass Spectrom.* **228** (2003) 237.

Einleitung

Massenspektrometrische Verfahren in der Bioanalytik wie die de-novo Peptidsequenzierung setzen eine sehr hohe Massenauflösung und Massengenauigkeit des Massenspektrometers voraus, wie sie zur Zeit noch nicht von mobilen Geräten erreicht werden. In diesem Vorhaben soll erstmals ein solches hochauflösendes und hochgenaues mobiles Massenspektrometer entwickelt werden. Bei Multireflexions-Flugzeitmassenspektrometern (MR-TOF-MS) wird die Flugstrecke von den zu analysierenden Ionen vielfach durchlaufen, woraus ein sehr kompakter Aufbau und ein sehr hohes Massenauflösungsvermögen folgen. Bisher wurde ein Massenauflösungsvermögen von 100.000 in einem Analysator mit einer Gesamtlänge von nur 40 cm erreicht.

Methoden

- API-Interface und Ionentransport in differentieller Pumpstufe mit RF-Fokussierung und unter Berücksichtigung der Gasdynamik
- Für die Flugzeitmassenspektrometrie optimiertes mehrstufiges RF-Fallensystem mit schneller Puffergaskühlung
- Multireflexions-Flugzeitmassenspektrometrie
- Für MR-TOF-MS entwickelte Spannungsstabilisierungen, Hochvoltpulser, RF-Generatoren und Spulensysteme
- Selbstoptimierendes Kontroll- und Datenaufnahmesystem für stabilen und anwenderfreundlichen Betrieb
- Design und Untersuchung der Elemente des Massenspektrometers mittels dedizierter Massenspektrometrie-Simulationssoftware

Arbeitspakete

- Arbeitspaket 1:** Design und Aufbau des Prototypen für ein MR-TOF-MS und eines Teststandes.
- Arbeitspaket 2:** Charakterisierung des MR-TOF-MS, Bestimmung und Optimierung des Massenauflösungsvermögens, der Massengenauigkeit und der Messzyklusdauer.
- Arbeitspaket 3:** Entwicklung von Verfahren zur Verbreiterung des Massenbereiches von coaxialen Multireflexion-Flugzeitmassenspektrometern bzw. zur Rekonstruktion von eindeutigen Breitband-Massenspektren. Eine automatisierte, angepasste Spreizung des Massenbereichs wird damit möglich sein (Zoom-Modus).
- Arbeitspaket 4:** Design eines differentiell gepumpten Transportsystems zur Ankopplung von atmosphärischen Ionenquellen an ein MR-TOF-MS.
- Arbeitspaket 5:** Entwicklung eines RF-Fallen-Systems für schnelle Ionenkühlung und zeit-schwankungsfreien Ausschuss für die Flugzeitmassenspektrometrie.
- Arbeitspaket 6:** Hard- und Softwareentwicklung eines selbstoptimierenden Kontroll- und Datenaufnahmesystems für mobile MR-TOF-MS.
- Arbeitspaket 7:** Design, Konstruktion, Aufbau und Inbetriebnahme eines mobilen MR-TOF-MS, das minimale Infrastrukturanforderungen aufweist.
- Arbeitspaket 8:** Erprobung und Charakterisierung des mobilen MR-TOF-MS mit in-situ-Ionenquellen (Projekte A1 und A3) und Transfersystemen (Projekt B1).

Arbeitsplan	1. Jahr	2. Jahr	3. Jahr
C2 - MR-TOF-MS			
Prototyp MR-TOF-MS	■		
Charakterisierung und Nutzungstest Prototyp	■	■	
Breitband-/Zoom-Modus MR-TOF-MS	■	■	
Entwicklung API-Interface	■		
Entwicklung RF-Fallen-System	■		
Systemkontroll- und Datenaufnahmesystem	■	■	
Entwicklung mobiles MR-TOF-MS	■	■	
Charakterisierung mobiles MR-TOF-MS	■	■	■